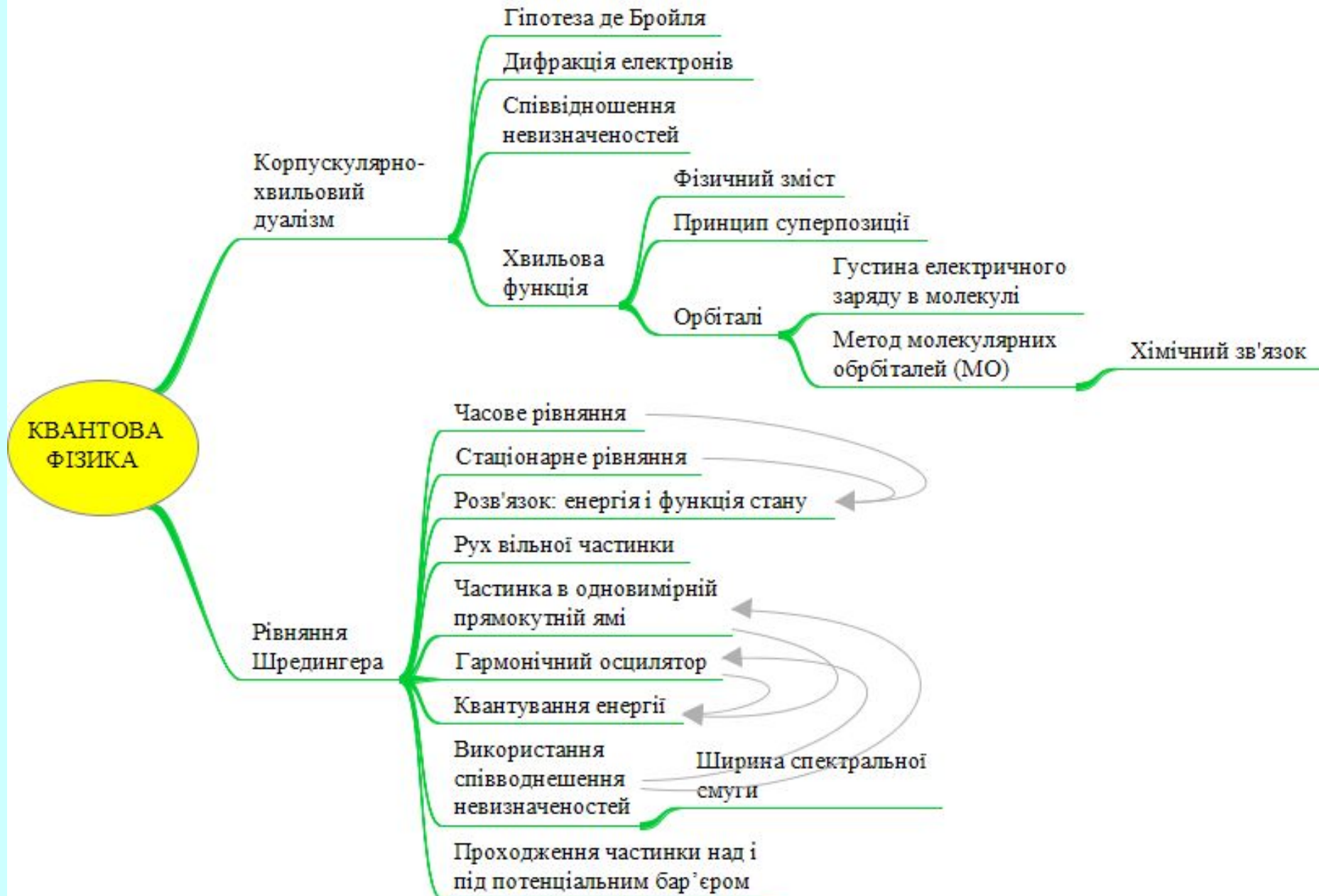


КВАНТОВА ФІЗИКА



Корпускулярно-хвильовий дуалізм.

Рівняння Шредингера

1. Гіпотеза де-Бройля.
2. Дифракція електронів.
3. Співвідношення невизначеностей.
4. Часове і стаціонарне рівняння Шредингера.
5. Квантування енергії.
6. Хвильова функція (орбіталь). Фізичний зміст.
7. Приклади застосування.

Формула де-Бройля

- Оскільки світло проявляє корпускулярно-хвильовий дуалізм, Луї де-Бройль в 1924 р. висунув гіпотезу, що і елементарні частинки будуть проявляти не лише корпускулярні, а і хвильові властивості.
- Для фотона $\varepsilon = h\nu$, $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c}$, $m = \frac{h\nu}{c^2}$
- За де-Бройлем для частинки існує такий же зв'язок, тобто

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu}$$

Формула де-Бройля

- Якщо нерелятивістська частинка має кінетичну енергію

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = eU, \text{ то } p = \sqrt{2mE_k} = \sqrt{2meU}$$

- Тоді $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{12,25}{\sqrt{U}} 10^{-10} \text{ м.}$

- Отже, для електронів, розігнаних до 1÷100 еВ матимемо довжину хвилі, характерну для рентгенівських спектрів.
- Експеримент Девісона і Джермера з розсіювання електронів на монокристалі Ni (1927 р.) підтвердив висновки теорії де-Бройля.

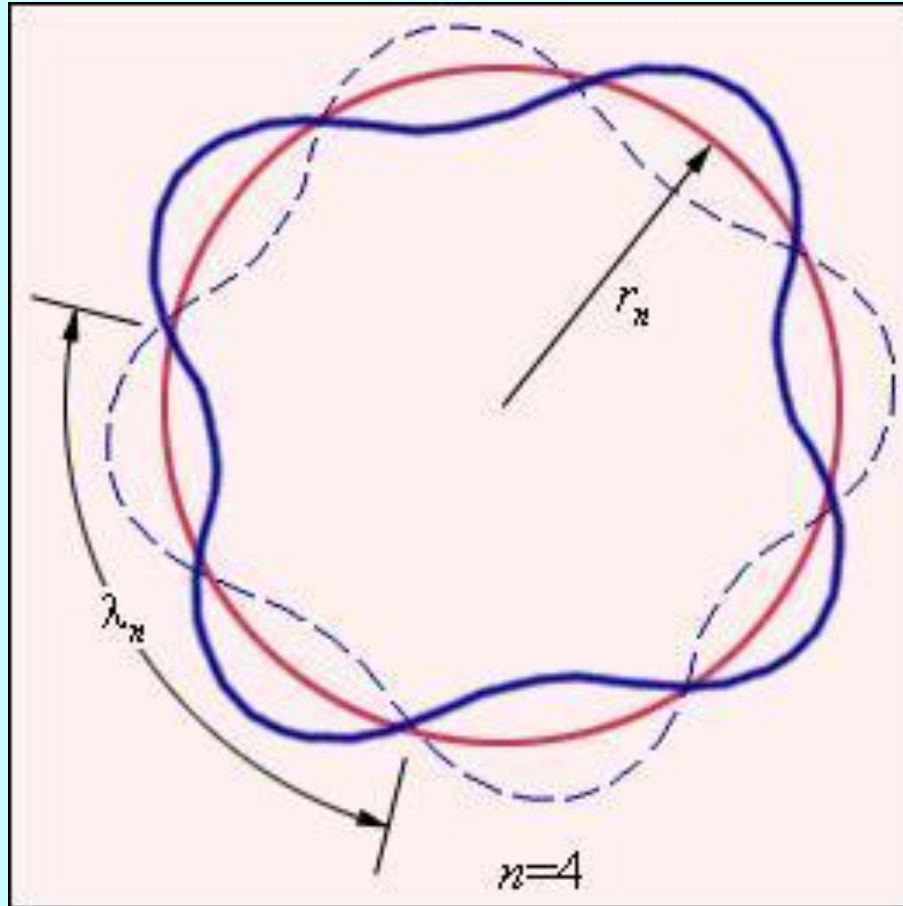
Формула де-Бройля

- Подивимось з позицій корпускулярно-хвильового дуалізму на атом водню.
- Згідно з другим постулатом Бора $mvr_n = n\hbar$. Звідси

$$2\pi r_n = \frac{nh}{mv} = n\lambda$$

- Отже, на довжині стаціонарної орбіти вкладається ціле число довжин хвиль λ . Інтерференція хвилі де-Бройля на орбіті дає інтерференційний максимум, що і забезпечує стаціонарність орбіти.

Стаціонарна орбіта



Формула де-Бройля

- При проходженні окремих електронів через тонкий монокристал отримуємо дифракційну картину. Отже, хвильові властивості притаманні окремому електрону.
- Таким чином, електрон – не маленька кулька. Він має складну структуру з корпускулярно-хвильовими властивостями.
- Хвильові властивості мають і всі інші елементарні частинки. В 1929 р. Штерн дослідив дифракцію атомів і молекул. Пізніше дослідили хвильові властивості нейтрона.
- Для важких тіл виявити хвильові властивості неможливо. Наприклад, для маси $m = 1$ г при $v = 100$ м/с $\lambda = 6,62 \cdot 10^{-33}$ м.

Співвідношення невизначеностей

- Розглянемо обмеження, які накладає корпускулярно-хвильовий дуалізм на можливість одночасного визначення імпульсу та координати частинок і фотонів.
- Хвильові властивості частинки спричинюють відсутність чіткої траєкторії її руху і неправомірність говорити про одночасне визначення імпульсу і координати. Хвиля заповнює певну область простору і не може локалізуватись в точку.
- Якщо фотон має точно відомий імпульс, тобто $\Delta p = 0$, йому відповідає не обмежена в просторі хвиля з $\lambda = h/p$. Отже, просторовий інтервал $\Delta x \rightarrow \infty$. Якщо ж область локалізації фотона обмежена (Δx обмежена), тоді це не монохроматична хвиля, а група хвиль, причому $\Delta p = \Delta(h/\lambda)$.

Співвідношення невизначеностей.

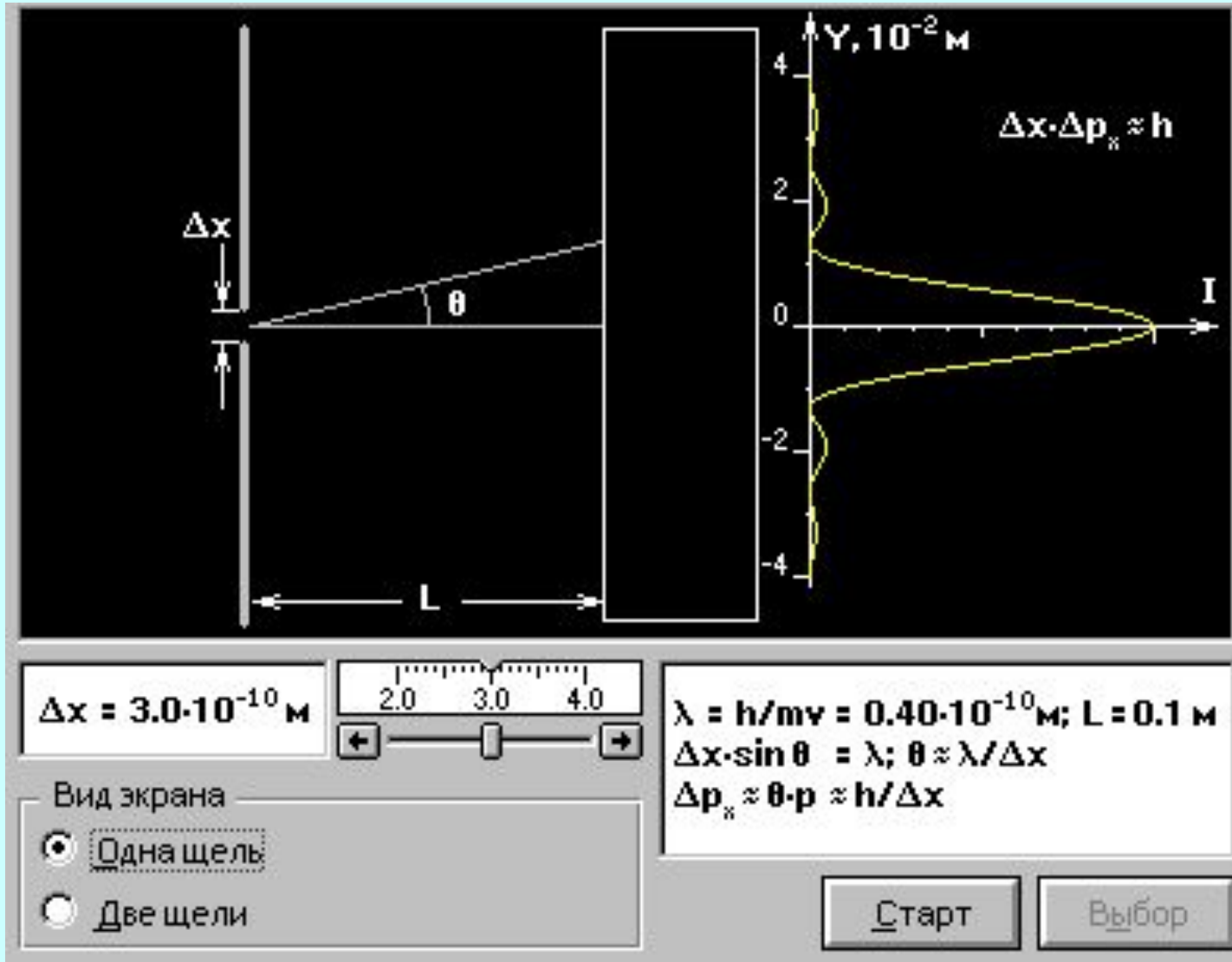
- Такі ж висновки справедливі і для частинок. В 1927 р. В. Гейзенберг знайшов співвідношення

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar$$

Добуток невизначеностей координати і відповідного їй імпульсу не може бути меншим від \hbar .

- Нехай потік електронів проходить через вузьку щілину Δx , розміщену \perp напрямку руху електронів. Відбудеться дифракція, яка спостерігається на екрані. В момент проходження через щілину координата визначається з точністю Δx . Внаслідок дифракції $\Delta p_x = p \cdot \sin\varphi$, $\Delta x \cdot \sin\varphi = \lambda$, отримаємо $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$.

Хвильові властивості частинок. Дифракція електронів.



Співвідношення невизначеностей

- Розглянемо електрон в атомі. Його положення визначається з точністю до розмірів атома $\Delta x \sim 10^{-10}$ м. В цьому випадку

$$\Delta v_x \geq \frac{h}{m\Delta x} = 1,2 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

- З класичної фізики $v = 2,3 \cdot 10^6$ м/с. Отже, Δv одного порядку з v , тому не можна говорити про рух по певній траєкторії і не можна користуватись законами класичної фізики.

- Можна записати

$$\Delta p_x \frac{\Delta x}{2} = (m\Delta v_x) \frac{(v_x \Delta t)}{2} = \Delta \left(\frac{mv_x^2}{2} \right) \Delta t = \Delta E_x \Delta t \geq \hbar$$

- Система, що має час життя Δt , не може мати чіткого значення енергії. Тому і для частоти фотона $\nu \pm \Delta E/h$.

Хвильова функція

- Потрібно з'ясувати фізичну природу хвиль де-Бройля. Порівнювали дифракцію світла і мікрочастинки.
- Для світла в результаті інтерференції є ослаблення чи підсилення амплітуди, а інтенсивність $\sim A^2$.
- З точки зору корпускулярної теорії інтенсивність пропорційна числу фотонів в даній точці дифракційної картини. Тобто, для кожного фотона квадрат амплітуди визначає ймовірність потрапляння фотона в ту чи іншу точку.
- Дифракція електронів аналогічна. Наявність максимумів свідчить про найбільшу інтенсивність хвиль де-Бройля. З іншого боку, інтенсивність більша там, де більше число електронів.

Хвильова функція

- Отже, дифракційна картина є проявом статистичної закономірності, згідно з якою частинки потрапили в ті місця, де інтенсивність хвиль де-Бройля найбільша.
- В 1926 р. Борн припустив, що за хвильовим законом змінюється не сама ймовірність знаходження електрона, а амплітуда ймовірності, яка позначається $\psi(x,y,z,t)$. Цю величину називають **хвильовою функцією**. Амплітуда може бути комплексною, а ймовірність пропорціональна квадрату модуля функції: $w \sim |\psi(x, y, z, t)|^2 = \psi\psi^*$
- Ймовірність знайти частинку в об'ємі dV :

$$dW = |\psi|^2 dV \Rightarrow |\psi|^2 = \frac{dW}{dV}, \quad W = \int_V |\psi|^2 dV = 1$$

Хвильова функція

Звідси $\int_V |\psi|^2 dV = 1$ – умова нормування хвильової функції.

Щоб функція ψ була характеристикою стану частинки, необхідно:

1) Функція ψ повинна бути скінченною, однозначною і неперервною.

2) Похідні $\frac{\partial \psi}{\partial x}$, $\frac{\partial \psi}{\partial y}$, $\frac{\partial \psi}{\partial z}$, $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ повинні бути неперервними.

3) Функція $|\psi|^2$ повинна бути інтегрованою.

Хвильова функція

- Якщо система може знаходитись в станах $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$, то вона може бути і в стані ψ , який є **суперпозицією** інших станів:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \quad c_n - \text{константи.}$$

- За допомогою функції ψ в квантовій механіці можна обчислити середні значення фізичних величин, які характеризують певний об'єкт. Наприклад, можна обчислити середню відстань від електрона до ядра в атомі:

$$\langle r \rangle = \int_V r |\psi|^2 dV$$

Хвильова функція

- Одноелектронну хвильову функцію в сферично симетричному електричному полі атомного ядра, яку задають головним n , орбітальним l і магнітним m квантовими числами, називають ще атомною орбіталлю.
- Назва «орбіталь» (а не орбіта) відображає геометричне уявлення про стаціонарні стани електрона в атомі; така особлива назва відображає той факт, що стан електрона в атомі описується законами квантової механіки і відрізняється від класичного руху по траєкторії.
- Сукупність атомних орбіталей з однаковим значенням головного квантового числа n складає одну електронну оболонку.

Хвильова функція

- Геометричне уявлення атомної орбіталі – область простору, обмежена поверхнею рівною густини (еквіденсійною поверхнею) ймовірності або заряду. Густина ймовірності на граничній поверхні вибирають виходячи з задачі, що розв'язують, але, зазвичай, таким чином, щоб ймовірність знаходження електрона в обмеженій області лежала в діапазоні значень 0,9-0,99.
- Оскільки енергія електрона визначається кулонівською взаємодією і, отже, відстанню від ядра, то головне квантове число n задає розмір орбіталі.

Хвильова функція

Орбіталі слетеровського типу мають наступний вигляд:

$$\Psi_{n,l,m}(r, \Theta, \varphi) = AY_{lm}(\Theta, \varphi)r^{n^*-1}e^{-\zeta r}$$

де

A – коефіцієнт норміровки

$Y_{lm}(\Theta, \varphi)$ – сферична гармоніка

n^* – ефективне квантове число, параметр, який залежить від головного квантового числа n і визначається емпірично

r – відстань між електроном і ядром

$$\zeta = \frac{Z-s}{n^*} \text{ орбітальна експонента}$$

Z – заряд ядра, s – константа екранування

Співвідношення значень n^* і n

n	1	2	3	4	5	6
n^*	1	2	3	3,7	4	4,2

Густина електричного заряду

- У квантовій механіці густина заряду, наприклад, електрона в атомі, співвідноситься з хвильової функцією $\psi(r)$ з допомогою наступного співвідношення: $\rho(r) = Q|\psi(r)|^2$

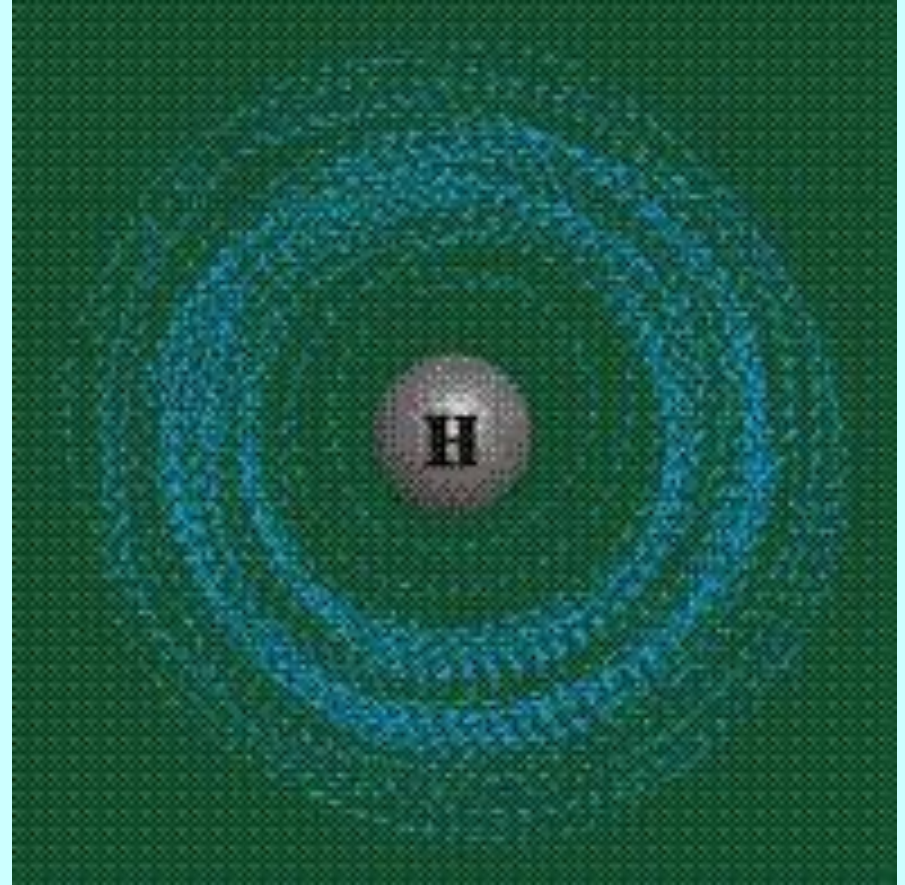
причому хвильова функція повинна мати нормування:

$$\int |\psi(r)|^2 dV = 1$$

Метод МО ЛКАО

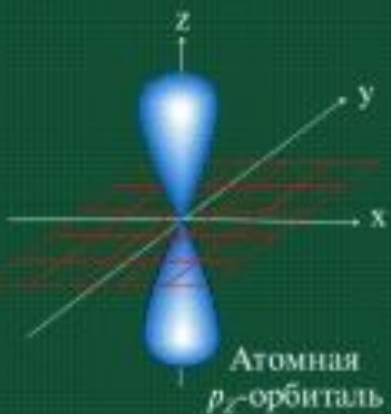
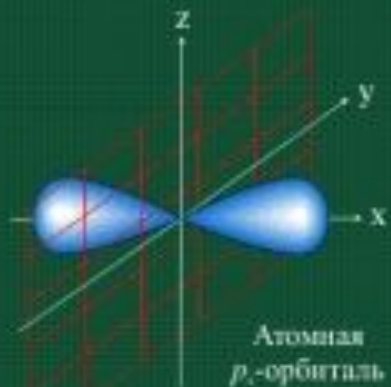
- Молекула розглядається як ціле, а не як сукупність атомів, що зберегли індивідуальність.
- Всі електрони даної молекули (як і в атомі) розподіляються за відповідними орбіталями.
- Хвильова функція ψ , яка залежить від чотирьох квантових чисел, що має конкретний математичний вигляд і задовольняє умові нормування і однозначності, називається молекулярної орбіталю (МО) (за аналогією з атомною).
- Кожна орбіталь характеризується своїм набором квантових чисел, що відображають властивості електронів в даному енергетичному стані. На відміну від одноцентрових орбіталей атомів, орбіталі молекул багатоцентрові, тобто молекули мають спільні орбіталі для двох або більше атомних ядер. Кожна молекулярна орбіталь має певну енергію, що наближено характеризується відповідним потенціалом іонізації.

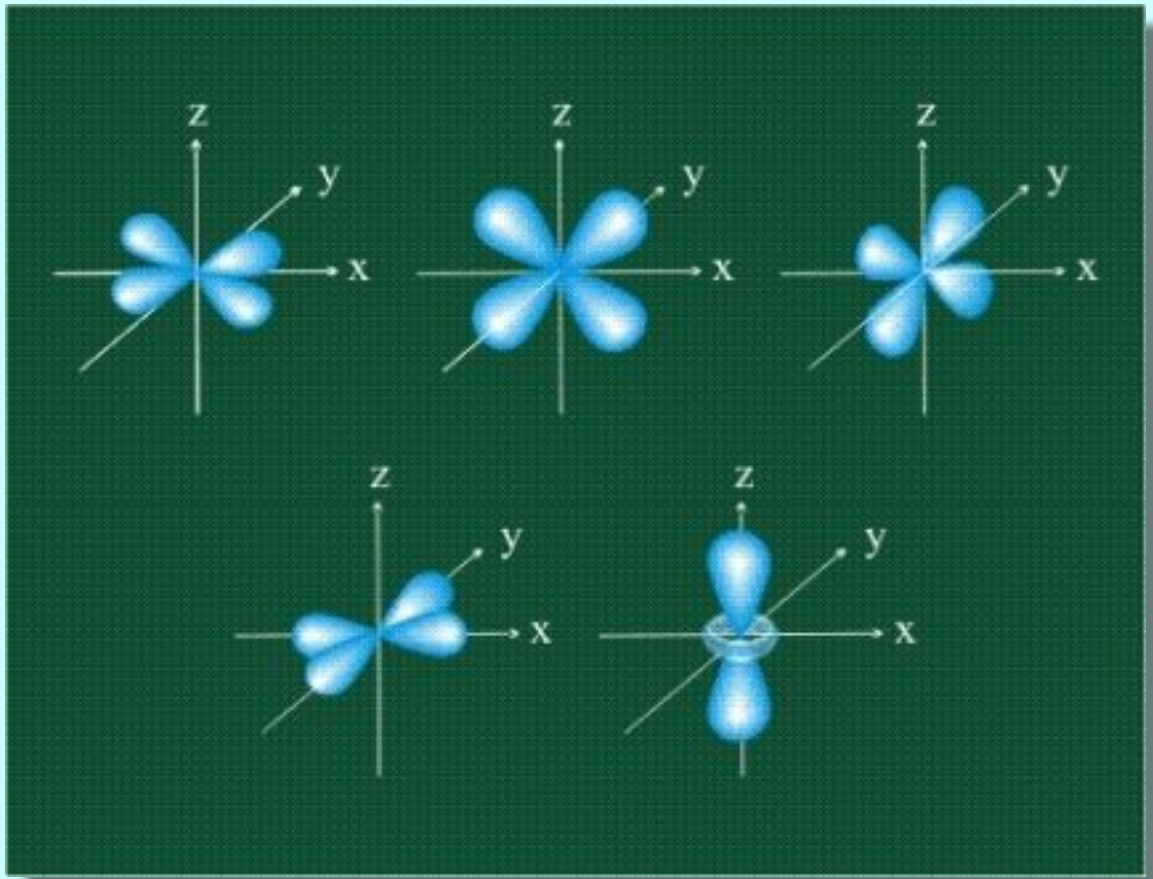
ОРБІТАЛЬ – область найбільш
можливого місцезнаходження
електрона в атомі (атомна
орбіталь) або в молекулі
(молекулярна орбіталь).
Електрон рухається в атомі
навколо ядра не по зафіксованій
лінії-орбіті, а займає деяку
область простору.



Орбіталь електрона у атома
водню

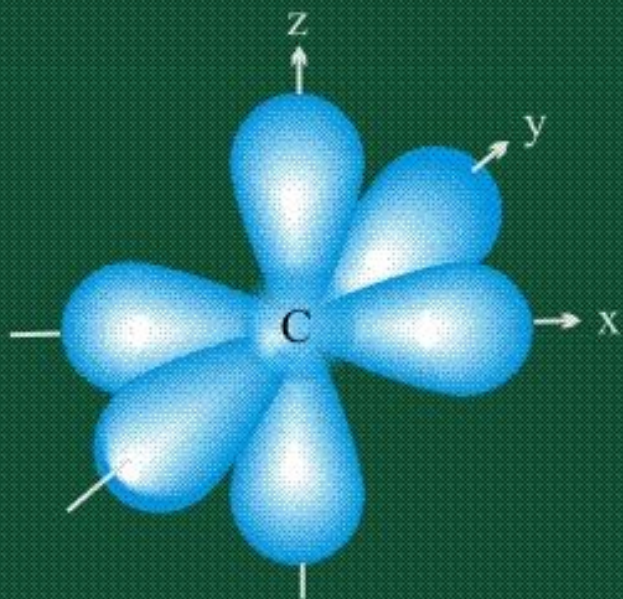
На даний момент описано п'ять типів орбіталей: s , p , d , f і g . Назви перших трьох склались історично, далі був обраний алфавітний принцип. Форми орбіталей розраховані методами квантової фізики.



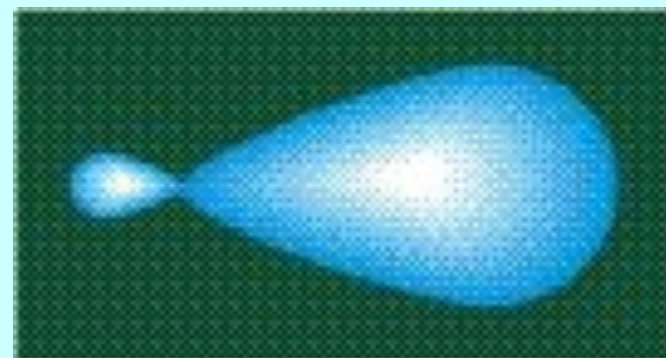


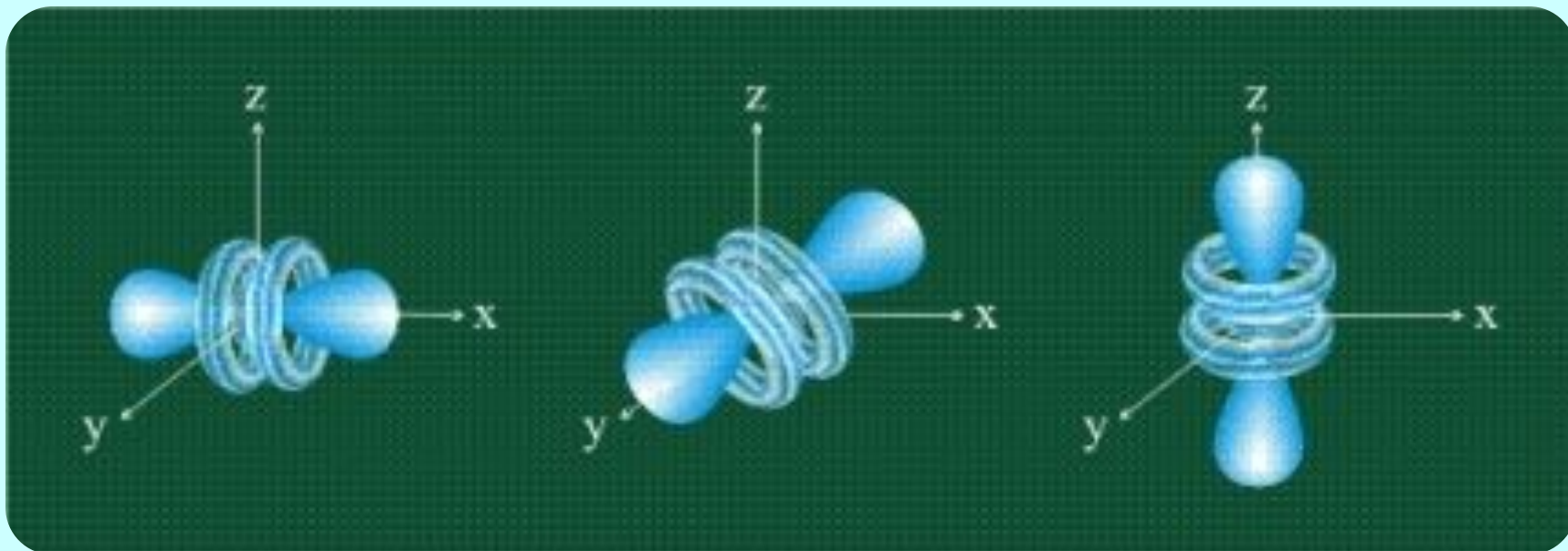
Починаючи з четвертого електронного рівня, у атомів з'являються п'ять *d*-орбіталей, їх заповнення електронами відбувається у перехідних елементів, починаючи зі скандію.

Чотири *d*-орбіталі мають форму об'ємних чотирилисників, які іноді називають «листом конюшини», вони відрізняються тільки орієнтацією в просторі, п'ята *d*-орбіталь представляє собою об'ємну вісімку, продіту в кільце.

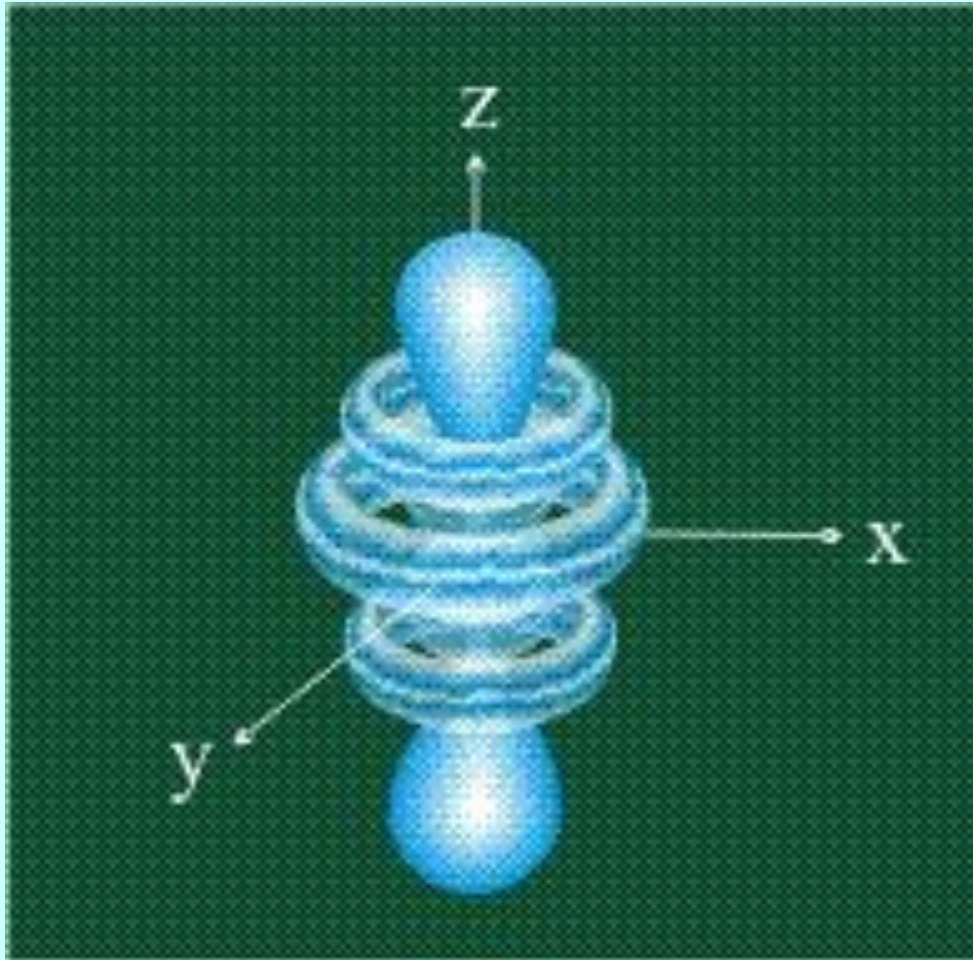


В тому випадку, коли атом вуглецю бере участь в утворенні насичених сполучень (які не мають кратних зв'язків), одна s -орбіталь і три p -орбіталі з'єднуються, утворюючи нові орбіталі, що являють собою гібриди початкових орбіталей (процес називають гібридизацією). Кількість гібридних орбіталей завжди рівна кількості вихідних. Отримані орбіталі-гібриди однакові за формою та зовні нагадують асиметричні об'ємні вісімки.





Починаючи із шостого електронного рівня, у атомів з'являються сім f -орбіталей, їх заповнення електронами відбувається в атомах лантаноїдів і актиноїдів. f -орбіталі мають доволі складну конфігурацію.

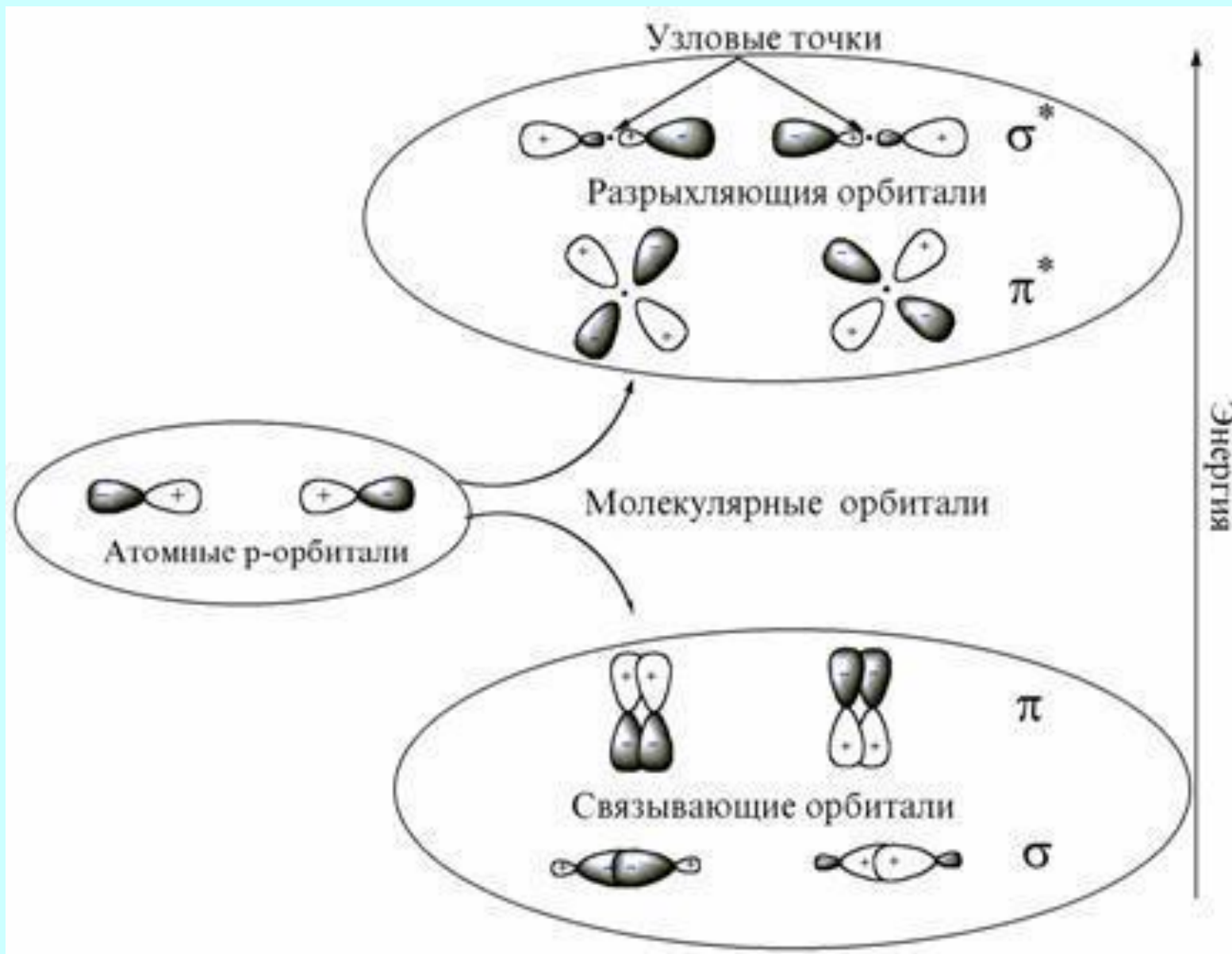


а восьмому електронному рівні знаходяться дев'ять орбіталей. Елементи, які мають електрони на цих орбіталях, повинні з'явитися у восьмому періоді, поки вони недоступні (найближчим часом очікується отримання елемента №118, останнього елемента сьомого періоду періодичної системи), його синтез проводять в Об'єднаному інституті ядерних досліджень в Дубні.

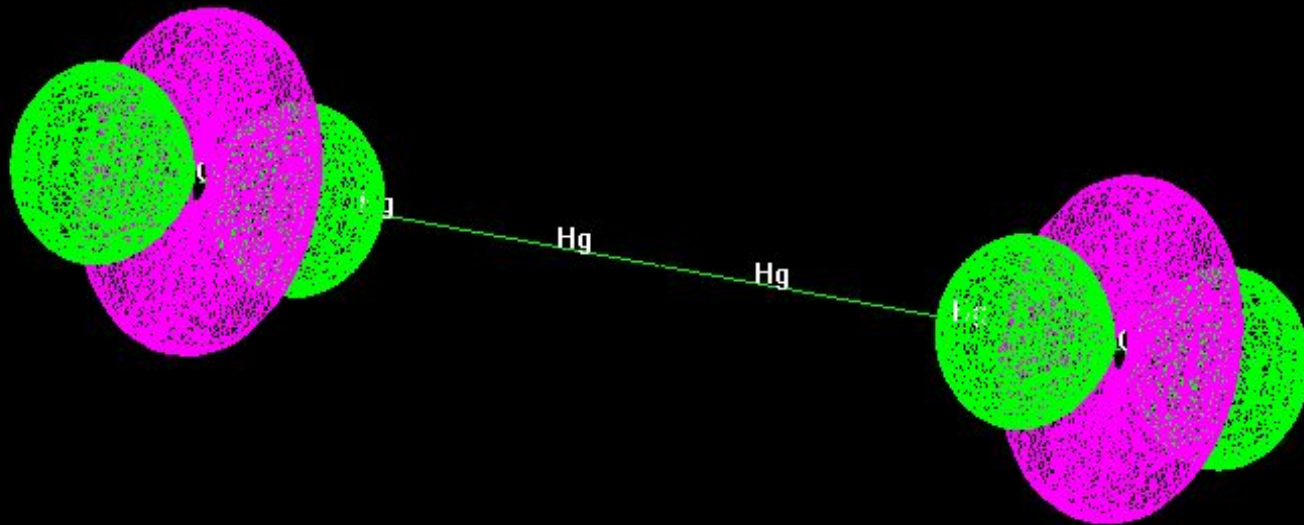
Хімічний зв'язок

- Хімічний зв'язок притягання між атомами або молекулами дозволяє утворення хімічних сполук, які містять два або більше атомів.
- Хімічний зв'язок викликається залученням електромагнітної сили між протилежними зарядами, або між електронами і ядрами, або в результаті дипольного притягання.
- Міцності зв'язків значно варіюють. Є "сильні зв'язки", такі як ковалентний або іонний зв'язок, і "слабкі зв'язки", такі як диполь-дипольна взаємодія, дисперсійні і водневі зв'язки.

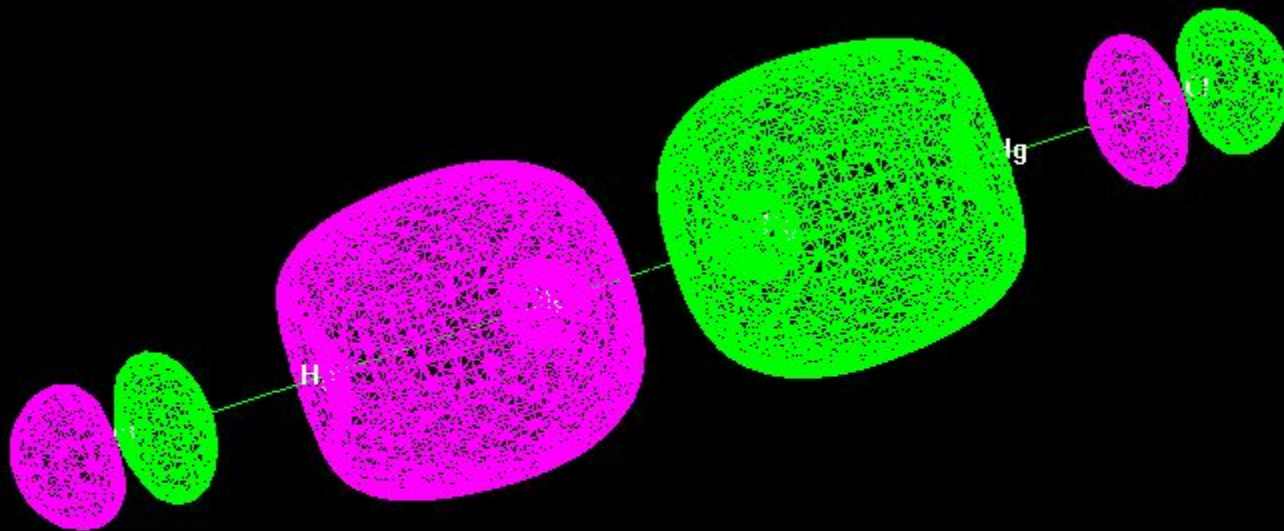
Хімічний зв'язок



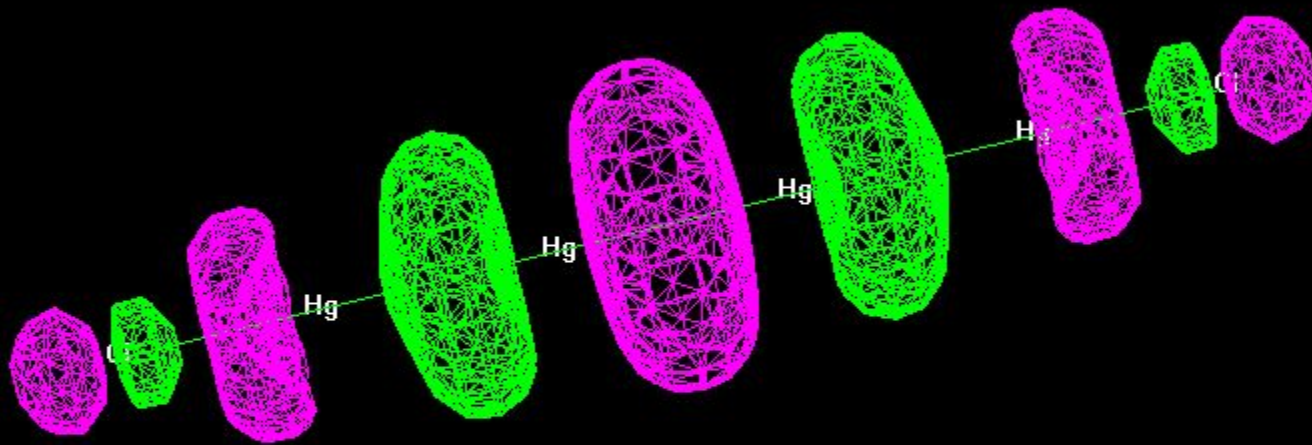
Молекулярні орбіталі



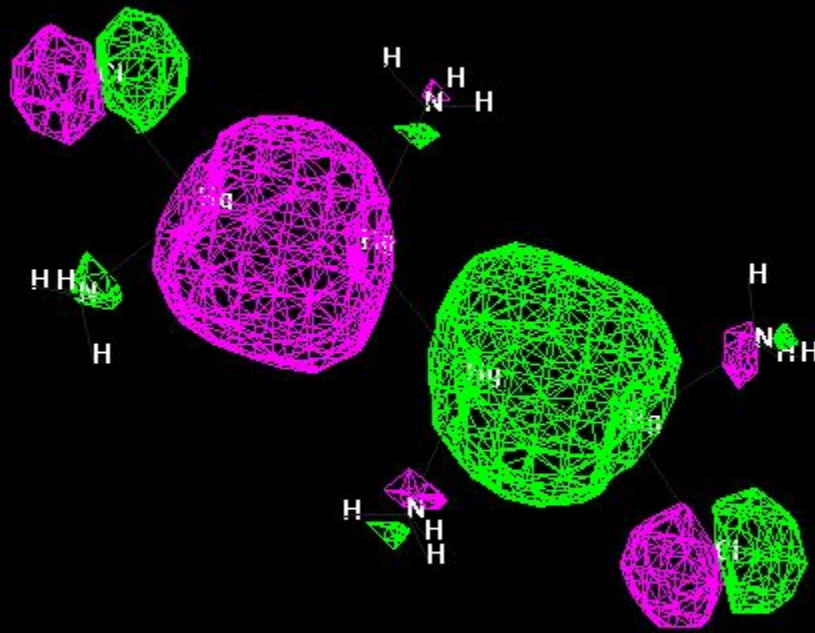
Молекулярні орбіталі



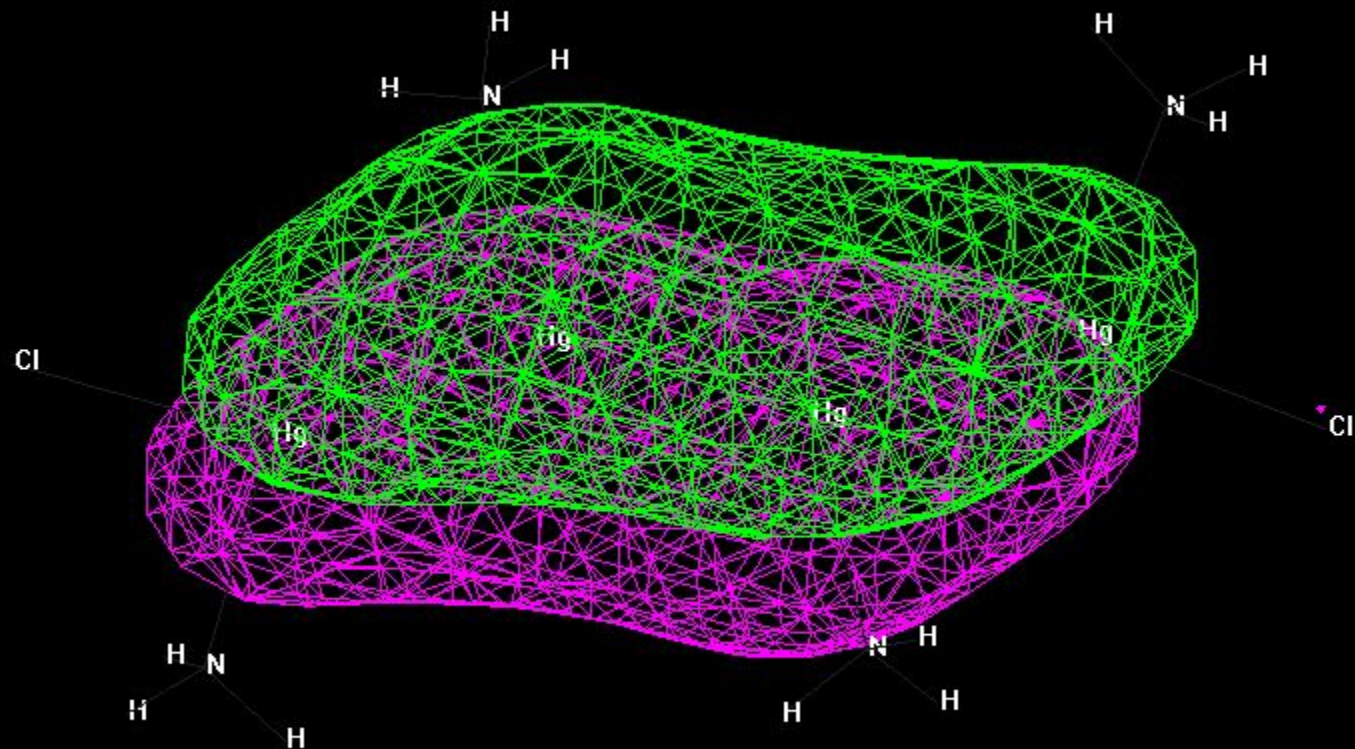
Молекулярні орбіталі



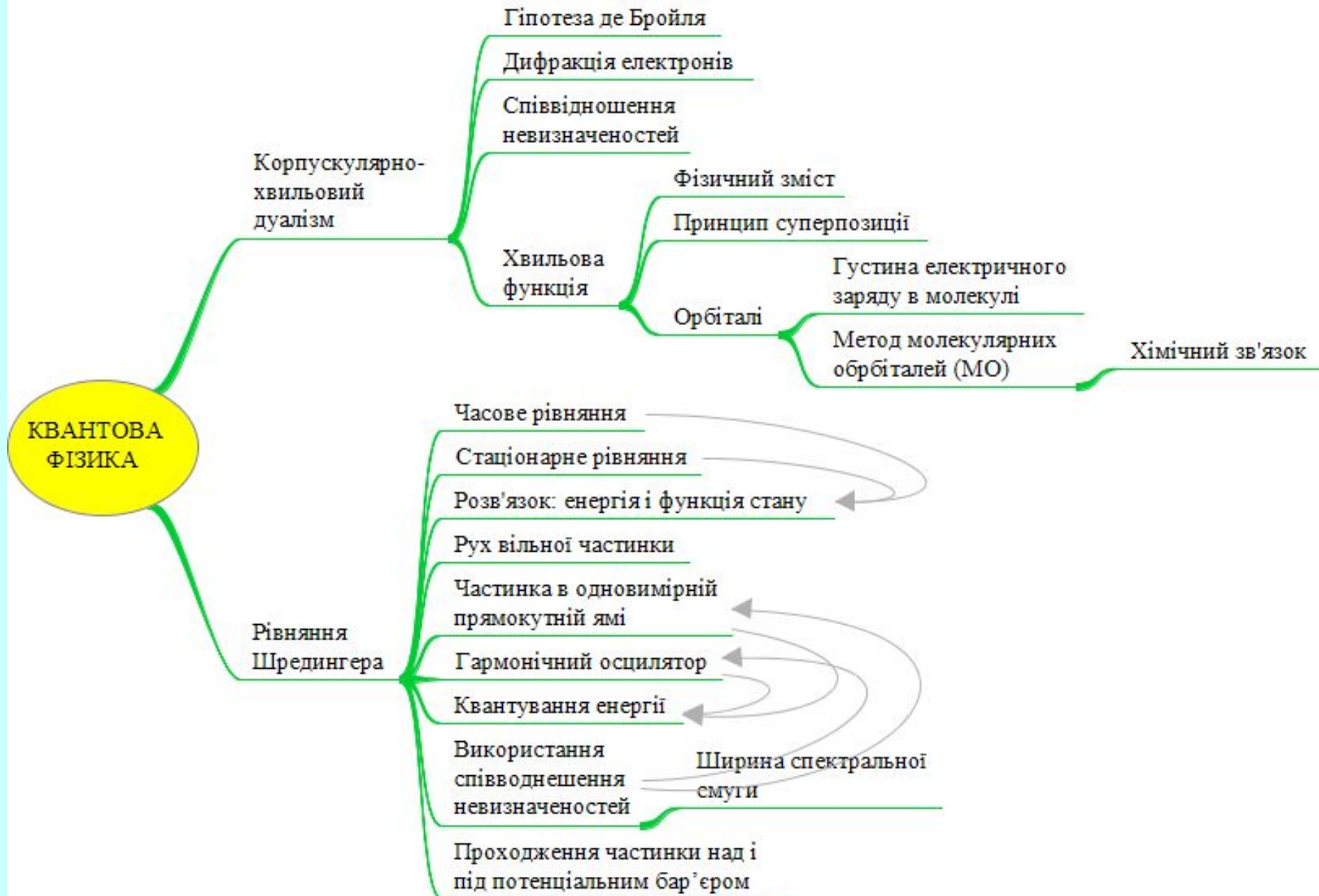
Молекулярні орбіталі



Молекулярні орбіталі



КВАНТОВА ФІЗИКА



Квантово-механічні задачі

1. Рівняння Шредінгера
2. Рух вільної частинки.
3. Частинка в одновимірній прямокутній потенціальній ямі.
4. Тунельний ефект.
5. Гармонічний осцилятор
6. Використання співвідношення невизначеностей

Рівняння Шредінгера

- Хвилі де-Бройля мають статистичне трактування. Цей факт та співвідношення невизначеностей вимагають, щоб рівняння руху в квантовій механіці було хвильовим. Рівняння повинно бути відносно $\psi(x, y, z, t)$, оскільки саме величина $|\psi|^2$ визначає ймовірність перебування частинки в момент часу t в об'ємі dV .
- Таке рівняння запропонував (постулював) Шредінгер у 1926 р.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x, y, z, t) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

- Правильність цього рівняння підтверджується експериментально.

Рівняння Шредінгера

- Таке рівняння справедливе для довільної частинки з $v \ll c$.
- Розглянемо вільну частинку, якій відповідає хвиля

$$\xi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

- Враховуючи, що

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

запишемо

$$\psi(x, y, z, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

Рівняння Шредінгера

- Знайдемо похідні

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar} p \right)^2 \psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi$$

- Звідси

$$E = \frac{i\hbar}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad p^2 = -\frac{\hbar^2}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Ці дані підставимо в формулу

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Рівняння Шредінгера

- Такий же вигляд має рівняння Шредінгера при $U = 0$.
- Якщо існує силове поле, тоді повна енергія E складається з кінетичної і потенціальної енергії. Тоді

$$\frac{p^2}{2m} = E - U$$

Підставивши, отримаємо повне рівняння Шредінгера.

Ми записали рівняння Шредінгера, що залежить від часу.

Проте, часто використовують стаціонарне рівняння.

Стаціонарне рівняння Шредінгера

- Шукаємо розв'язок у вигляді

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et)}$$

Підставивши в рівняння Шредінгера, отримаємо

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + (E - U) \psi(x, y, z) = 0$$

Це і є стаціонарне рівняння Шредінгера. Функції ψ , які задовольняють рівняння при певній величині E , називаються власними функціями.

Розв'язок існує не при довільних E , а лише при певних.

Рух вільної частинки

- Застосуємо рівняння Шредінгера до руху вільної частинки.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + E \psi(x, y, z) = 0$$

Енергія $E = E_k$. Частинний розв'язок:

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mEx}} + B e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mEx}}$$

Повний розв'язок:

$$\psi(x, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \sqrt{2mEx})} + B e^{-\frac{i}{\hbar} (Et + \sqrt{2mEx})}$$

Рух вільної частинки

- Маємо суперпозицію двох плоских хвиль однакової частоти $\omega = E/\hbar$. Порівняння з виразом для плоскої хвилі

$$\xi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

дає $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Отже, вільній частинці відповідає плоска монохроматична хвиля де-Бройля. Власні значення енергії

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

можуть мати довільне значення. Енергетичний спектр **неперервний**.

Рух вільної частинки

- Ймовірність знайти частинку в певній точці простору

$$|\psi|^2 = |A|^2 = \text{const}$$

- Отже, як і слід чекати для монохроматичної хвилі, вона повністю делокалізована.
- Для реальної частинки її делокалізація неможлива. Отже, буде не монохроматична хвиля, а група хвиль.

Частинка в одновимірній прямокутній потенціальній ямі

- Розглянемо прямокутну потенціальну яму, для якої

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq \boxed{x} \\ \infty & \text{при } x > \boxed{x} \end{cases}$$

Рівняння Шредінгера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + (E - U) \psi(x, y, z) = 0$$

Яма має безмежно високі стінки, тому ймовірність знайти частинку за межами ями дорівнює нулю. Отже

$$\psi(0) = \psi(\boxed{x}) = 0$$

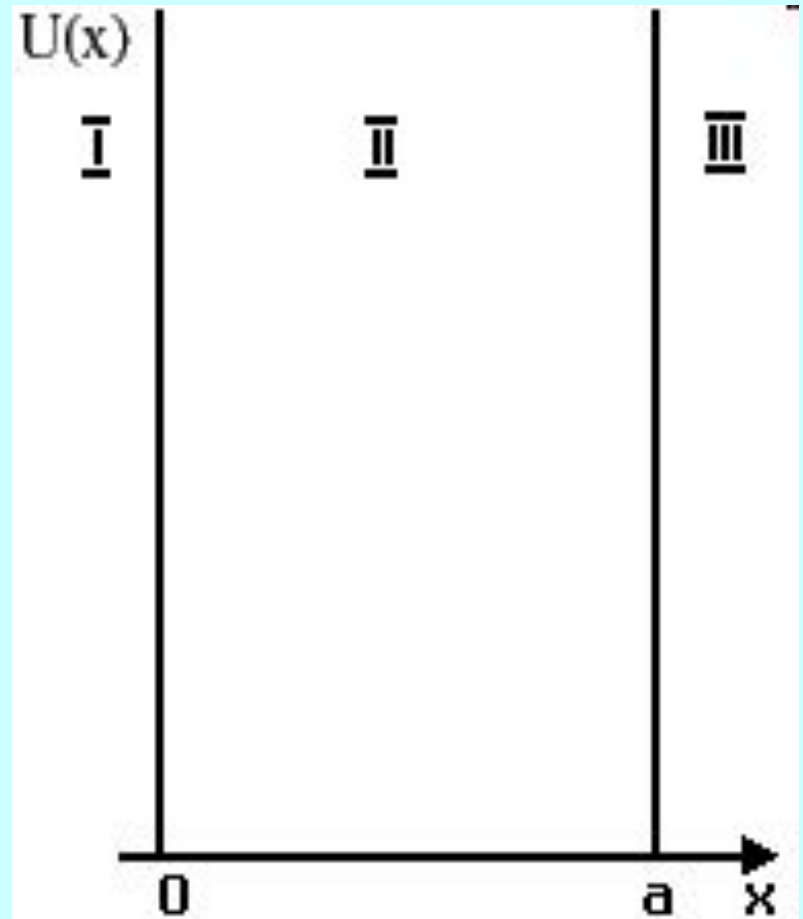


Рис. 1 Потенциальная энергия как функция координаты

Частинка в одновимірній прямокутній потенціальній ямі

- В межах ями

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

- Розв'язок $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$

Оскільки $\psi(0) = 0$, то $B = 0$.

Отже, $\psi(x) = A \sin(kx)$

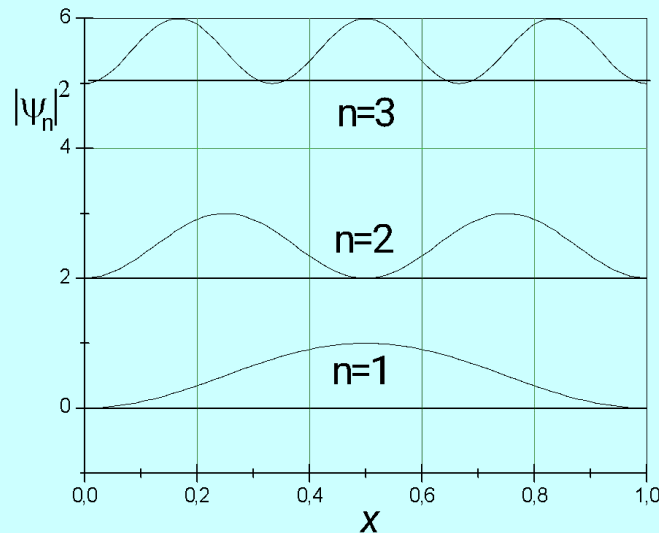
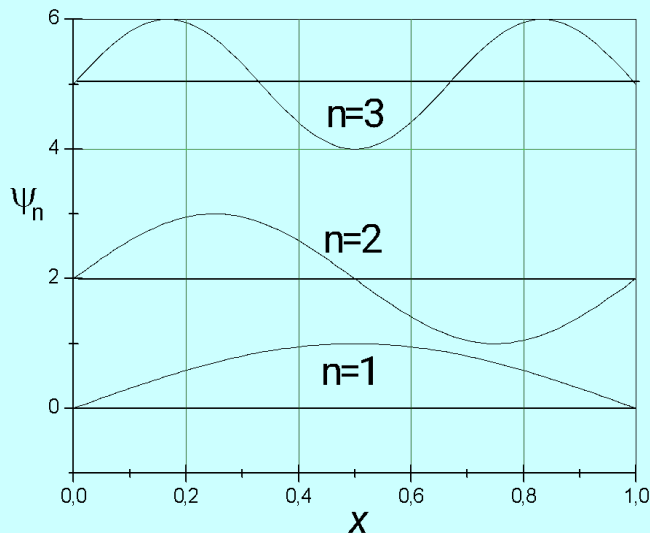
Умова $\psi(\ell) = 0$ виконується при $k\ell = n\pi$, n – цілі числа.

$$k^2 = \left(\frac{n\pi}{\hbar} \right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_n \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\hbar^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Частинка в одновимірній прямокутній потенціальній ямі

- Для $n = 1$ $\psi(x) = A \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ – максимум ймовірності знаходиться в центрі ями. Для $n = 2$ в центрі $|\psi_2|^2 = 0$.

Оскільки $\int_0^a |\psi|^2 dx = 1$, то $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$



Частинка в одновимірній прямокутній потенціальній ямі

- Різниця енергій двох сусідніх рівнів

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m \ell^2} (2n + 1)$$

збільшується зі збільшенням n .

Якщо яма широка, наприклад, $\ell = 0,1$ м, тоді

$$\Delta E_n = 6 \cdot 10^{-36} \cdot (2n + 1) \text{ Дж} = (2n + 1) \cdot 3,7 \cdot 10^{-17} \text{ eV}$$

Тобто, рівні лежать так тісно, що утворюють неперервний спектр. Якщо ж $\ell = 10^{-10}$ м, то $\Delta E_n = (2n+1) \cdot 37$ eV.

Тепер дискретність рівнів значна.

Гармонічний осцилятор

- Хвильове рівняння, яке описує гармонічний осцилятор, має вигляд:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 \right) \varphi = 0$$

Розв'язком цього рівняння є: $E_n = \hbar\omega_0(n+1/2)$, $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi), \quad H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\xi} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$$

де $\xi = \frac{x}{x_0}$, $x_0 = \sqrt{\hbar / m\omega_0}$, $H_n(\xi)$ – поліном Ерміта, $n = 0, 1, 2, \dots$

Гармонічний осцилятор

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0} \sqrt{\pi}} e^{-x^2/2x_0^2}$$

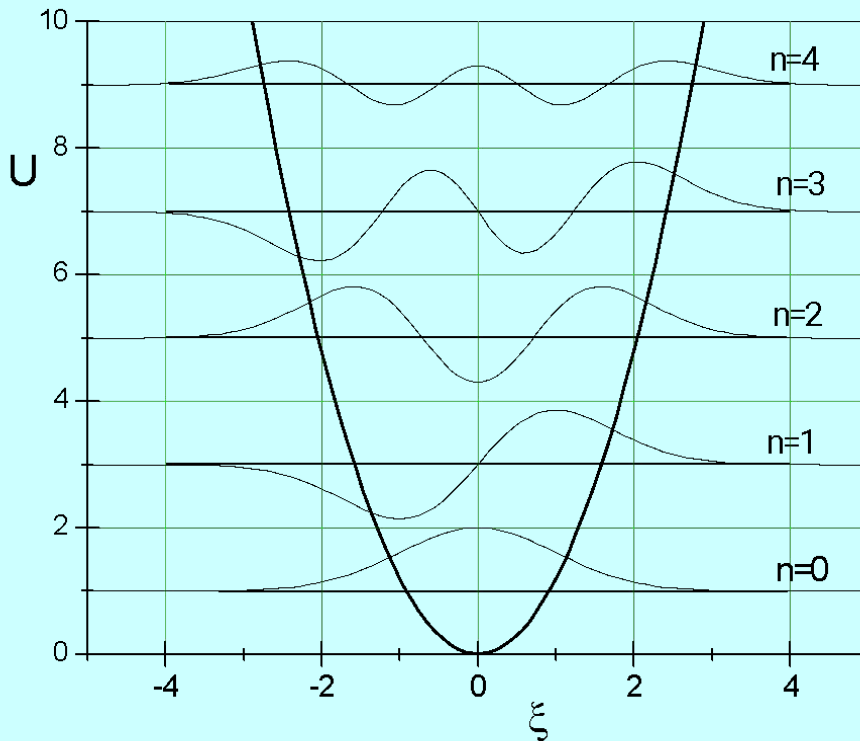
$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0} \sqrt{\pi}} \frac{2x}{x_0} e^{-x^2/2x_0^2}$$

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0} \sqrt{\pi}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2 \right) e^{-x^2/2x_0^2}$$

Енергетичні рівні розташовані еквідистантно ($\Delta E = \hbar\omega_0$).

Правила відбору $\Delta n = \pm 1$.
Отже, енергія змінюється лише порціями $\hbar\omega_0$.

Найменша енергія гармонічного осцилятора $E_0 = \hbar\omega/2$.
Навіть при $T \rightarrow 0$ система коливається.



Використання співвідношення невизначеностей

- Розрахуємо співвідношення невизначеностей для розрахунку енергій в одновимірній потенціальній ямі та для гармонічного осцилятора.
- У випадку одновимірної потенціальної ями: $\Delta p = p$, $\Delta x = \ell$
- $\Delta p \Delta x = p \ell = \pi \hbar \Rightarrow p = \pi \hbar / \ell$.

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m \ell^2} = E_1$$

Використання співвідношення невизначеностей

- Тепер розрахуємо енергію гармонічного осцилятора:

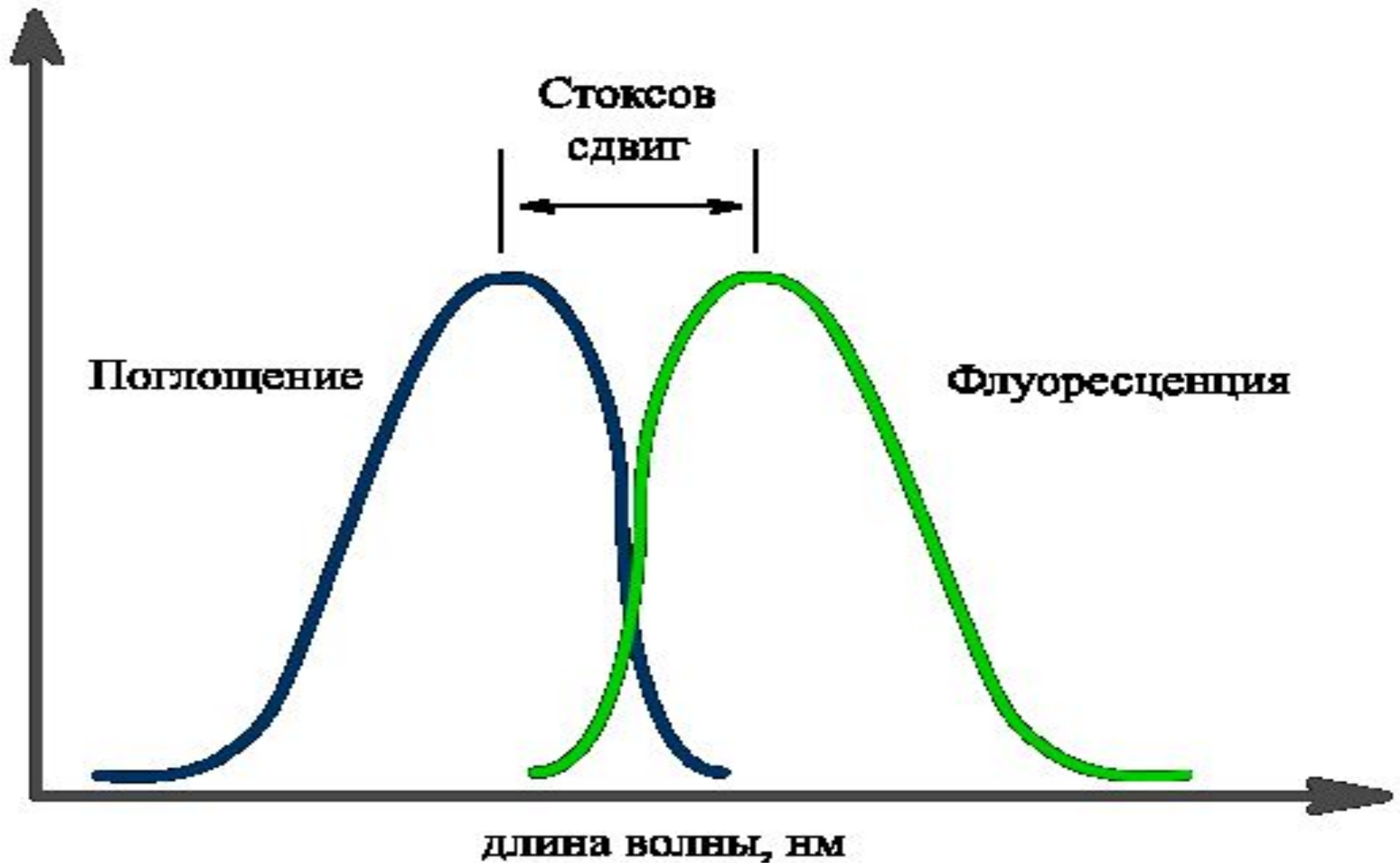
$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}, \quad \Delta p \Delta x = px = \hbar, \quad x = \frac{\hbar}{p}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k\hbar^2}{2p^2}, \quad \text{мінімізуємо} \quad \frac{\partial E}{\partial p} = 0 = \frac{p}{m} - \frac{k\hbar^2}{p^3}$$

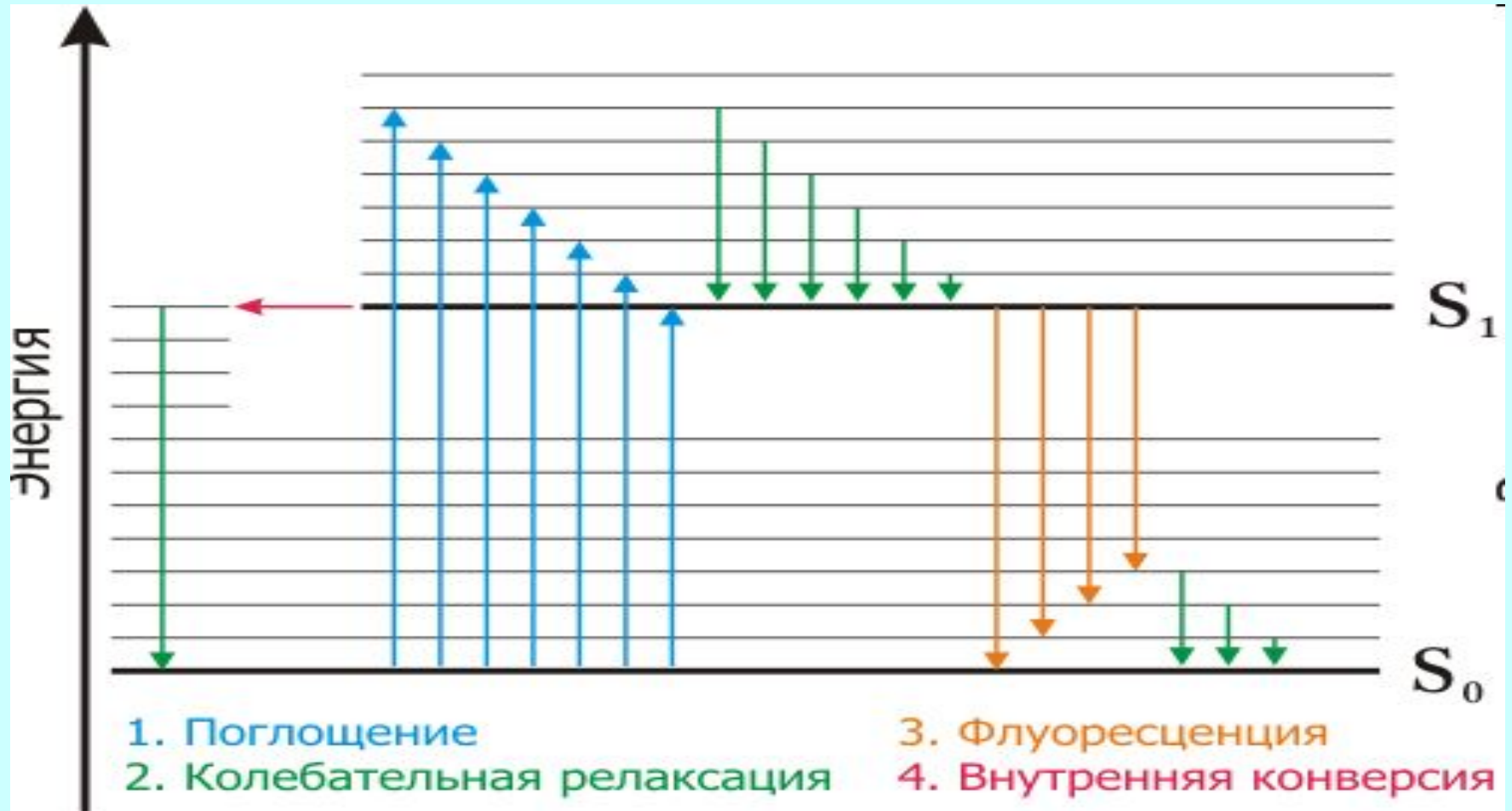
Звідси

$$p^2 = \hbar \sqrt{km}, \quad E = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} + \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} = \hbar \omega$$

Природна ширина рівня



Природна ширина рівня



Діаграма Яблонського процесів поглинання і випромінювання світла

Природна ширина рівня

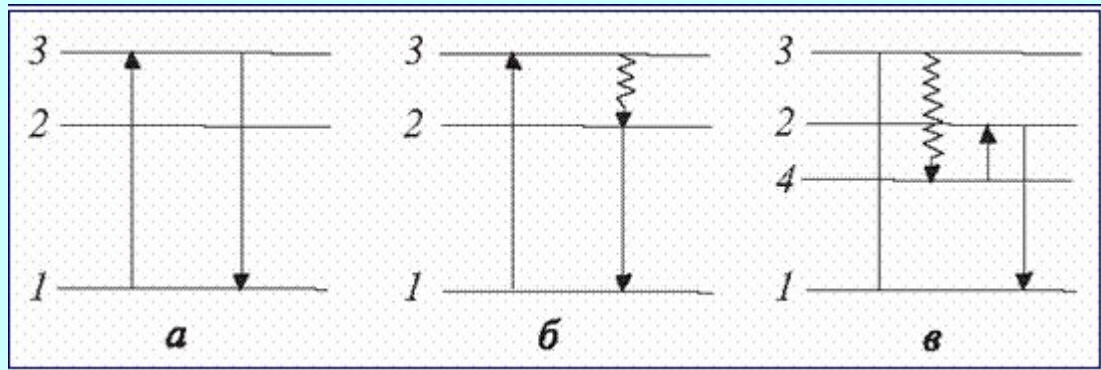


Схема енергетичних рівнів та електронних переходів при резонансній (а), спонтанній (б) і вимушеній (в) люмінесценції:

1 - основний рівень;

2, 3 - збуджені рівні;

4 - метастабільний рівень;

↑ - поглинання;

↓ - люмінесценція;

{ - безвипромінювальної перехід

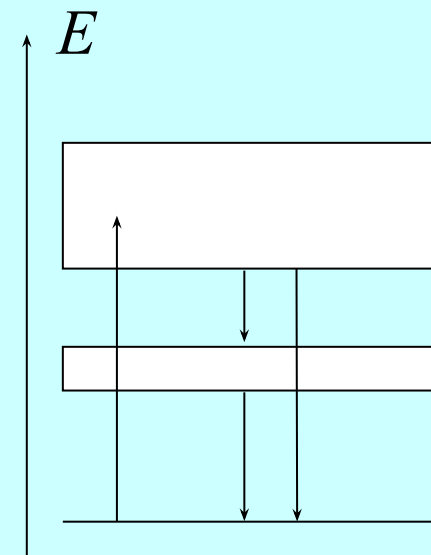


Схема енергетичних рівнів та електронних переходів при поглинанні та люмінесценції між рівнями з різним часом життя стану

Природна ширина рівня

ШИРИНА РІВНЯ – невизначеність енергії квантово-механічної системи (атома, молекули та ін), що має дискретні рівні енергії в стані, якій не є строго стаціонарним.

Ширина рівня ΔE , що характеризує розмиття рівня енергії, його розширення, залежить від середньої тривалості перебування системи у цьому стані – часу життя на рівні $\Delta \tau$ і, згідно співвідношенню невизначеностей для енергії і часу $\Delta E = \hbar / \Delta \tau$

Для суворо стаціонарного стану системи $\Delta \tau = \infty$ і $\Delta E = 0$.

Природна ширина рівня

Час життя $\Delta\tau$, а отже, і ширина рівня обумовлені можливістю квантових переходів системи в стани з іншими енергіями.

Для вільної системи (напр., для ізольованого атома) спонтанні випромінювальні переходи з рівня на нижні рівні визначають радіаційну, або природну, ширину рівня:

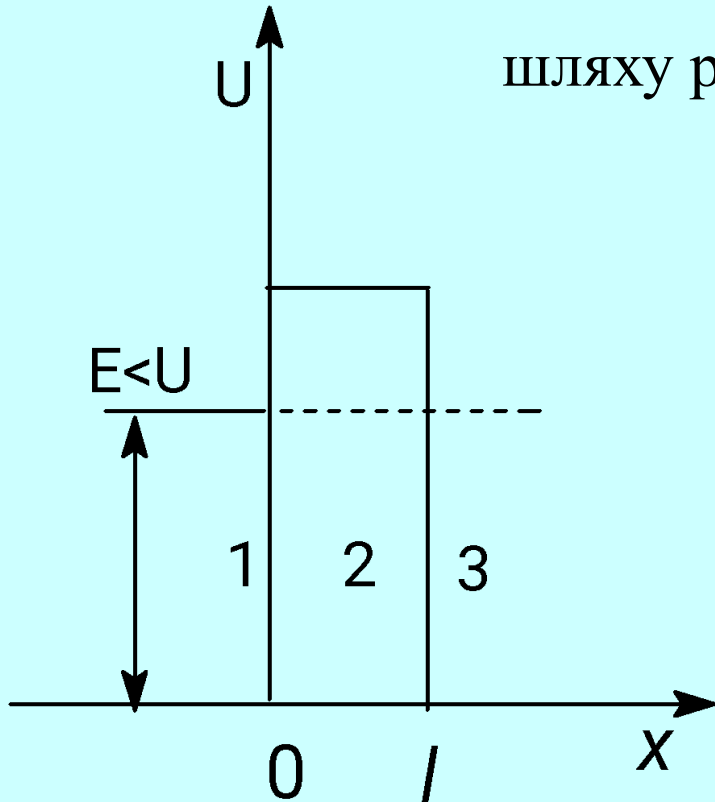
$$\Delta E = A_k \hbar,$$

де $A_k = \sum A_{ki}$ – повна ймовірність спонтанного випускання з рівня,

A_{ki} - коефіцієнт Ейнштейна для спонтанного випускання.

Тунельний ефект

Розглянемо бар'єр прямокутної форми на шляху руху частинок.



$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \\ U & \text{при } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{при } x > l \end{cases}$$

В класичній фізиці частинка з $E > U$ пройде над бар'єром, а з $E < U$ відіб'ється.

Для мікрочастинки навіть при $E > U$ існує відбивання частинки, а при $E < U$ є ймовірність того, що частинка проникне через бар'єр.

Тунельний ефект

- Для областей 1 і 3 $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
- Для області 2 $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + q^2 \psi = 0, \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)$

Розв'язок $\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$

$$\psi_2 = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$$

$$\psi_3 = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$$

В області 3 є лише хвиля, яка пройшла через бар'єр, тобто

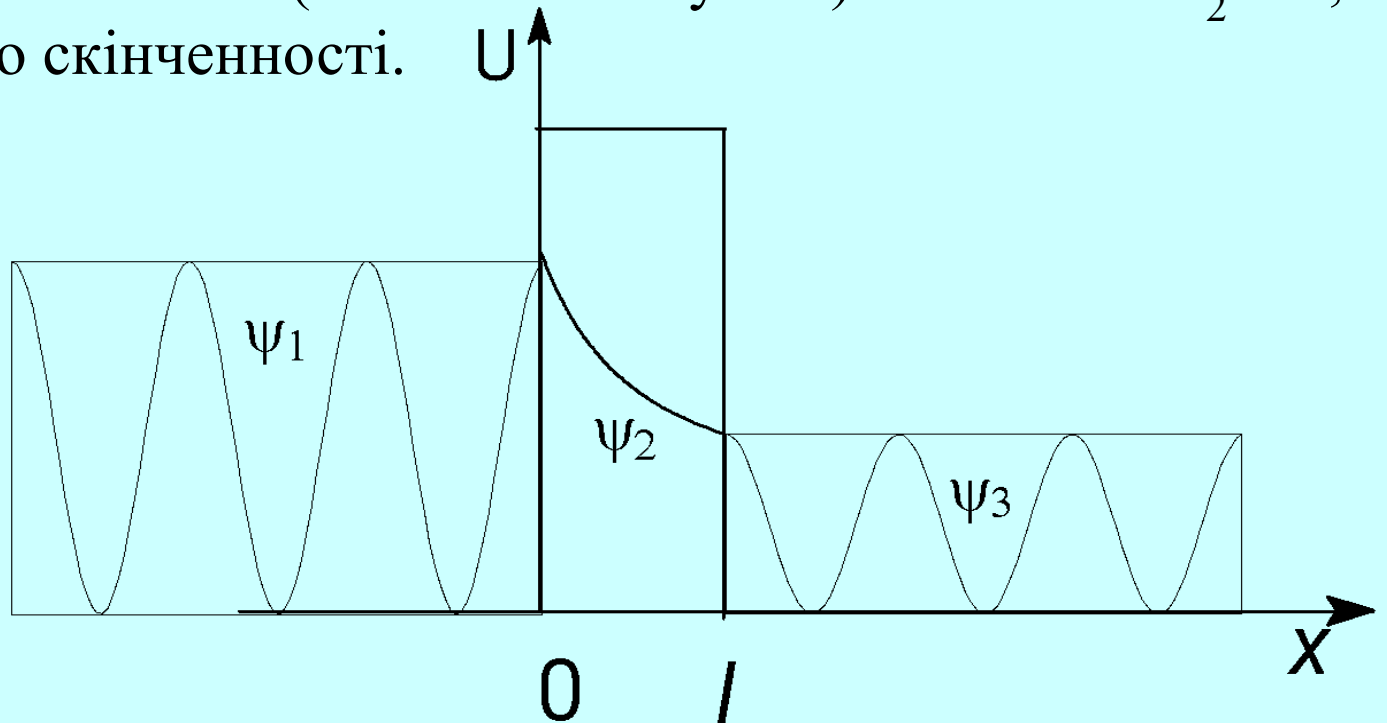
$$\psi_3 = A_3 e^{ikx} \quad i \quad B_3 = 0$$

Тунельний ефект

- Для випадку $E < U$ $q = i\beta = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar}$

Тому в області 2 $\psi_2 = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x}$

Це не плоска хвиля (показники не уявні). Величина $B_2 = 0$, за умовою скінченності.



Тунельний ефект

- Ймовірність проходження електрона через бар'єр (коефіцієнт прозорості) дорівнює

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

Щоб знайти величину D , необхідно використати умову неперервності функції ψ у всій області змін x . Отже, $\psi_1(0) = \psi_2(0)$, $\psi_2(\ell) = \psi_3(\ell)$. Щоб функція була гладкою, необхідно, щоб і похідні були неперервними.

Якщо $B_1 = 0$, то $A_1 = A_2$, $A_2 e^{-\beta \ell} = A_3 e^{ik\ell}$

Тунельний ефект

- Тепер знайдемо D

$$D = \frac{|A_3 e^{ik\hbar}|^2}{|A_1|^2} = e^{-2\beta\hbar} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}\hbar\right]$$

Для бар'єра довільної форми

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U-E)} dx\right], \quad U = U(x)$$

З формули випливає, що величина D залежить від маси мікрочастинки, ширини бар'єра і різниці $(U - E)$.

Тунельний ефект

- Тунелювання є квантовим ефектом, який існує внаслідок співвідношення невизначеностей. Невизначеність Δp на відрізку $\Delta x = \ell$ $\Delta p > h/\ell$. Цьому відповідає невизначеність кінетичної енергії $(p \pm \Delta p)^2/2m$, якої може бути достатньо для подолання бар'єра.
- Експеримент підтверджує тунельний ефект:
 - холодна емісія електронів з металу,
 - радіоактивний α -розпад,
 - перебіг термоядерних реакцій тощо.

Е́рвін Шре́дінґер

(*Erwin Schrödinger* 12.08.1887 – 04.01.1961)



Австрійський фізик-теоретик, один із засновників квантової механіки. Нобелівська премія з фізики 1933 р.

Навчався у Віденському університеті. Працював у Цюріхському, Вроцлавському, Берлінському та Оксфордському університетах.

Розробив квантову механіку та хвильову теорії матерії. Він довів еквівалентність його теорії матричній механіці Гейзенберга.